System theory and system identification of compartmental systems

Hof, Jacoba Marchiena van den

Publication date:
1996

Samenvatting

Systeemtheorie en systeemidentificatie van compartimentele systemen

Er is een toenemend besef dat het milieu om ons heen er slecht aan toe is. Op veel plaatsen zijn het water, de bodem en de lucht vervuild. Wat is het gevolg daarvan bij de mens? Welke stoffen zijn giftig en bij welke hoeveelheden richten ze echt schade aan?

Om informatie te leveren voor het gezondheids- en milieubeleid heeft de overheid het Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieuhygiëne (RIVM) te Bilthoven opgericht. Hier worden overheidsbeslissingen voorbereid omtrent de opslag van kernafval, de controle van sulfiet-emissies, de controle van gifstoffen in voedsel en industriële produkten, enzovoort. Gebruik makend van wiskundige modellen kunnen potentiële beslissingen geëvalueerd worden op hun effecten. Om bijvoorbeeld het effect van gifstoffen bij mensen te bepalen, zal onderzocht moeten worden hoe die stoffen zich in het lichaam gedragen. Hiervoor kan een wiskundig model opgesteld worden. Er is dus behoefte aan wiskundige modellen binnen de volksgezondheid en het milieubeheer. Voor deze modellen moeten procedures ontwikkeld worden die de onbekende paremeters schatten op basis van schaarse gegevens. Er kan immers niet eindeloos geëxperimenteerd worden met mens en dier. Daarnaast moeten procedures worden ontwikkeld waarmee de overheid op basis van de modellen normen kan stellen.

Compartimentele systemen zijn veelgebruikte modellen binnen de wiskundige biologie. Een compartimenteel systeem bestaat uit verschillende compartimenten met min of meer homogene hoeveelheden materiaal. Door middel van transport- en diffusieprocessen zijn de compartimenten met elkaar verbonden. Compartimentele systemen bestaan uit ingangen (instroom), toestanden (hoeveelheden of concentraties van materiaal in de compartimenten) en uitgangen (waarnemingen). Deze variabelen zijn allemaal positief. Systemen met deze eigenschap worden in de systeemtheorie positieve systemen genoemd. Compartimentele systemen vormen een deelklasse van de positieve systemen, niet alleen omdat ze positief zijn, maar ook omdat massabehoud moet gelden. Vaak kan het dynamisch gedrag van de betrokken concentraties in een eerste benadering lineair genomen worden. We hebben dan te maken met lineaire compartimentele systemen en de aldus verkregen modellen vormen een deelklasse van positieve lineaire systemen.

De vragen van volksgezondheid en milieubeheer kunnen vertaald worden in vragen voor de klasse van compartimentele systemen: hoe vinden we een systeem in de klasse van compartimentele systemen dat realistisch is maar niet te complex? Hoe kan zo'n systeem gebruikt worden voor regeling en voorspellingen?

Om de problemen op te lossen worden begrippen en middelen uit de systeem- en regeltheorie gebruikt. De aanpak voor systeemidentificatie van compartimentele systemen komt neer op het volgen van de procedure zoals die gebruikt wordt voor systeemidentificatie van eindig-dimensionale lineaire systemen. Het verschil tussen systeemidentificatie van compartimentele systemen en die van eindig-dimensionale systemen en Gaussische systemen is dat een compartimenteel systeem een eindig-dimensionale *positief* systeem is. Daarom moet positieve lineaire algebra in plaats van gewone lineaire algebra gebruikt worden. Helaas is de positieve lineaire algebra nog niet zover ontwikkeld als de lineaire algebra. Vele theoretische aspecten moeten nog verder ontwikkeld worden.

Een procedure voor systeemidentificatie van eindig-dimensionale systemen bestaat uit de volgende stappen.

Procedure voor systeemidentificatie. Veronderstel dat er een te modelleren verschijnsel omschreven is, samen met het doel van het model.

1. **Modelklasse** Selecteer een klasse van wiskundige modellen waaruit een model voor het verschijnsel gekozen kan worden.

2. **Experimenteren** Bedenk een experiment, kies ingangen, voer als dat mogelijk is het experiment uit en verzamel gegevens van het verschijnsel.

3. **Realisatie en parametrisatie** Beschrijf de klassen van modellen die hetzelfde externe gedrag vertonen en selecteer een parametrisatie.

4. **Selectie** Selecteer een model in de modelklasse op basis van de experimentele gegevens en een criterium, zodat dit model realistisch en niet te complex is.

5. **Evaluatie** Evalueer het geselecteerde model op basis van extra criteria (andere dan in stap 4). Als het model niet goed genoeg is, pas de keuzemogelijkheden van deze procedure, zoals de modelklasse, aan en herhaal de noodzakelijke stappen.

De structuur van dit proefschrift is zoveel mogelijk volgens de bovenstaande procedure voor systeemidentificatie. Na een algemene inleiding in Hoofdstuk 1 wordt in Hoofdstuk 2 de modelklasse van compartimentele systemen beschreven. De voor het proefschrift belangrijke eigenschappen komen aan bod. Hiervan verschenen de meeste al in de literatuur. Door middel van een grafische representatie worden verschillende klassen van compartimentele systemen geïntroduceerd.

In Hoofdstuk 3 wordt het probleem van de structurele identificeerbaarheid behandeld. Er worden methodes voorgesteld om de structurele identificeerbaarheid van lineaire compartimentele systemen te testen. De methode is gebaseerd op equivalente transformaties. Deze aanpak maakt gebruik van de realisatietheorie voor tijd-invariante eindig-dimensionale lineaire systemen. Een nadeel is dat het alleen de structurele identificeerbaarheid vanaf de Markov parameters bekijkt, wat in principe voldoende is als er zonder beperkingen en op lange termijn geëxperimenteerd kan worden. Maar voor sommige problemen, zoals de problemen in dit proefschrift of economische problemen, is het vanuit moreel of economisch oogpunt niet mogelijk onbeperkt te experimenteren. Dat is de reden om de structurele identificeerbaarheid vanaf de Markov parameters uit te breiden naar structurele identificeerbaarheid vanaf de gegevens van de in- en uitgangen, dat wil zeggen de directe waarnemingen. Hierbij moet ook rekening worden gehouden met de beginvoorwaarde, die bij lange termijn experimenten verwaarloosd kan worden. Er wordt onderscheid gemaakt tussen discrete-tijd en bemonsterde continue-tijd gestructureerde lineaire dynamische systemen. Daarnaast geven we voorwaarden voor structurele identificeerbaarheid van gestructureerde positieve lineaire systemen, maar deze zijn alleen voldoende. Om nodige en voldoende voorwaarden voor structurele identificeerbaarheid te verkrijgen moet eerst het realisatie probleem voor positieve lineaire systemen opgelost worden. Dit wordt in Hoofdstuk 5 behandeld.

In Hoofdstuk 4 wordt de positieve lineaire algebra, die nodig is voor de realisatie van positieve lineaire systemen, behandeld. Een belangrijk probleem in de positieve lineaire algebra is het factorisatie probleem voor positieve matrices. Hiervoor is het begrip van *positieve rang* nodig. Een factorisatie van positieve matrices wordt geassocieerd met een *extreme factorisatie*, die op haar beurt weer met een *priem* in de positieve matrices geassocieerd kan worden. Om die reden wordt in de secties 4.2 en 4.3 de theorie van priemen in de klassen van positieve matrices, van dubbel stochastische matrices en van dubbel stochastische circulanten behandeld. Deze klassen zijn monoïden met betrekking tot vermenigvuldiging. Een priem in deze klassen is een matrix die geen eenheid is en ook niet gefactoriseerd kan worden in twee niet-eenheden in de betreffende klasse. Er wordt een gedeeltelijke classificatie van de priemen in de drie verschillende klassen gegeven, in het bijzonder in de klasse van dubbel stochastische circulanten. Zo laten we bijvoorbeeld zien dat de classificatie van een priem in de dubbel stochastische circulanten equivalent is met de oplosbaarheid van een lineaire vergelijking over een dubbel stochastische circulant. Daarnaast wordt een representatie van dubbel stochastische circulanten gegeven als polynomen in de quotient semi-ring $R_+[z]$. De studie van priemen in de dubbel stochastische circulanten wordt gemotiveerd door het feit dat dubbel stochastische circulanten nauw verwant zijn aan Hankel matrices voor systemen met één ingang en één uitgang. Bovendien zijn sommige priemen in de dubbel stochastische circulanten ook priem in de dubbel stochastische matrices of zelfs in de positieve matrices. In de secties 4.4 en 4.5 geven we een relatie tussen polyhedrale kegels en positieve matrices. De factorisatie van positieve matrices is equivalent met de constructie van een polyhedrale kegel die een andere bepaalde polyhedrale kegel bevat. Vanuit dit oogpunt definiëren we *extreme kegels.* Deze kegels blijken nauw gerelateerd aan priemen in de positieve matrices. Parallel aan het begrip rang in de lineaire algebra, kan in de positieve lineaire algebra het begrip *positieve rang* gedefinieerd worden. We stellen een procedure voor om de positieve rang van een positieve matrix te bepalen, maar een volledig toe te passen algoritme kan nog niet gegeven worden. Het idee van de procedure is om extreme kegels te vinden die de met de positieve matrix overeenkomende kegel bevat.

Hoofdstuk 5 is gewijd aan het realisatie probleem voor positieve lineaire systemen. Als er een positieve impulse response functie gegeven is, dan is het positieve realisatie probleem het vinden van een positief lineair systeem met een zelfde impulse response functie. Hierbij worden vier deelproblemen beschouwd: het bestaan van een positieve realisatie, de karakterisatie van de minimaliteit, de classificatie en de relatie tussen verschillende realisaties. Een positieve realisatie van een impulse response functie heet *minimaal* als de toestandsruimte als vectorruimte over de positieve getallen minimale dimensie heeft. De resultaten hebben sterk te maken met Hoofdstuk 4. Voor het bestaan van een positieve realisatie presenteren we nodige en voldoende voorwaarden in termen van polyhedrale kegels. In tegenstelling tot vergelijkbare voorwaarden voor gewone lineaire systemen zijn deze voorwaarden als inclusie-relatie gesteld in plaats van als gelijkheid. Voor de karakterisatie van de minimaliteit geven we een voldoende voorwaarde in termen van de positieve rang. Deze voorwaarde is zwakker dan de voorwaarden van bereikbaarheid en waarneembaarheid voor gewone lineaire systemen. Om een nodige en voldoende voorwaarde te krijgen, introduceren we het begrip *positieve systeem rang.* Verder worden voor een speciale klasse van impulse response functies alle minimale positieve realisaties gegeven. Hiermee wordt een aanwijzing gegeven voor de aanpak van het classificatie probleem in het algemeen. Ook laat het zien dat er meerdere equivalentie klassen van minimale positieve realisaties van dezelfde impulse response functie kunnen bestaan. Bij gewone lineaire systemen bestaat er slechts één equivalentie klasse. De bovenstaande resultaten hebben voornamelijk betrekking op discrete-tijd positieve lineaire systemen. Aan het eind van het hoofdstuk, in sectie 5.6, laten we zien dat de resultaten voor continue-tijd positieve lineaire systemen door middel van een transformatie van het discrete-tijd geval afgeleid kunnen worden.

In Hoofdstuk 6 leiden we positieve lineaire waarnemers voor lineaire compartimentele systemen af. Net als bij de gewone lineaire systeemtheorie kan de toestand x benaderd worden door $\widehat{x}$. De waarnemer moet zodanig zijn dat de fout die we maken, $\widehat{x}(t) - x(t)$, naar nul convergeert. Bovendien moet voor positieve lineaire systemen de waarnemer zo gekozen worden, dat de benadering $\widehat{x}(t)$, net als de toestand $x(t)$ zelf, positief is. Voor de systeem-matrices van een compartimenteel systeem leiden we nodige en voldoende voorwaarden af voor het bestaan van een positieve lineaire waarnemer die aan bovengenoemde specificaties voldoet. De condities blijken hoofdzakelijk van de structuur van het systeem af te hangen. We behandelen het continue-tijd geval en het discrete-tijd geval afzonderlijk.

In Hoofdstuk 7 bekijken we het benaderingsprobleem. Hieronder wordt het volgende verstaan: selecteer een systeem in de modelklasse zodat de in- en uitgangen van dit systeem zo goed mogelijk overeenkomen met de waarnemingen. Hierbij wordt een benaderingscriterium gebruikt. Voor tijd-invariante eindig-dimensionale lineaire systemen wordt het kleinste kwadraten criterium veel gebruikt. Nauw verwant hiermee is de likelihood functie (het aannemelijkheidsquotiënt), dat gebruikt wordt voor stochastische systemen met Gaussische waarnemingsruis. Voor systeemidentificatie van positieve lineaire systemen lijkt het kleinste kwadraten criterium in het algemeen niet geschikt. We werken een speciaal niet-lineair criterium uit voor positieve lineaire systemen, gemotiveerd door een stochastisch systeem met inverse gamma verdeelde waarnemingsruis. De onderliggende niet-lineaire functie is strict convex. Op basis van dit criterium en een positieve lineaire waarnemer voor positieve lineaire systemen, zoals afgeleid in Hoofdstuk 6, wordt een algoritme gegeven. De resultaten worden aan de hand van een voorbeeld geïllustreerd.

De structurele identificeerbaarheid van drie compartimentele systemen, zoals die gebruikt worden bij het RIVM, wordt getest in Hoofdstuk 8. Twee daarvan, het nitraat model en het benzo(a)pyreen model, werden bij het RIVM ontwikkeld. Eveneens wordt een meer algemene klasse van compartimentele systemen bestudeerd. We gebruiken de methode van Hoofdstuk 3 om te bepalen of de modellen structureel identificeerbaar zijn. Bovendien geven we een indicatie voor de keuze van de ingangen, zodat er voldoende informatieve gegevens verzameld kunnen worden voor het schatten van de parameters. De voorwaarden voor structurele identificeerbaarheid van de drie voorbeelden zijn getest met behulp van het symbolisch manipulatie pakket Maple V. De procedures en sessies zijn in de appendix van Hoofdstuk 8 opgenomen.